



جمهورية العراق
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة الموصل / كلية العلوم
قسم الكيمياء

تحضير وتشخيص معقدات جديدة لعناصر انتقالية وغير انتقالية
مع ليكاندات حلقيه غير متجانسة مشتقة من الايميدازول
وتقييم فعاليتها البكتيرية

رؤى رأفت عبد الجبار

رسالة ماجستير

الكيمياء / الكيمياء اللاعضوية

بإشراف

الأستاذ المساعد الدكتورة فرح طارق سعيد

الخلاصة

يتضمن البحث في هذه الرسالة تحضير وتشخيص (٣٠) معقدا تناسقيا فضلا عن تحضير ثلاث ليكاندات اساسية، تضمن البحث أربعة اجزاء هي:

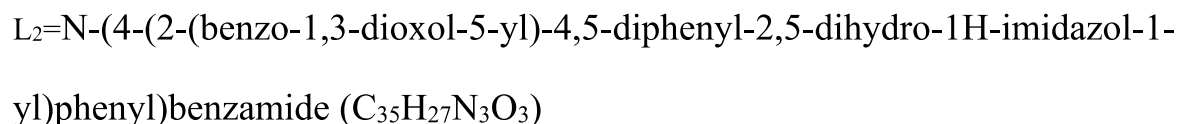
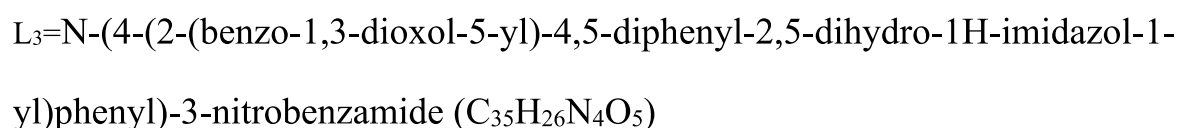
الجزء الاول: تحضير الليكاند (L_1) عن طريق مفاعلة مولات متكافئة من البايبيرونال وثنائي الكيتون (البنزل) وبارا فينيلين ثنائي الأمين وخلات الأمونيوم.



aniline ($C_{28}H_{23}N_3O_2$)

الجزء الثاني : تحضير المعقدات التناسقية لليكاند في اعلاه وبنسب مولية (١:٢) (١:٤) ليكاند إلى الأيون الفلزي والأملاح الفلزية المستعملة هي ($Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II)$) وكانت المعقدات الصيغة العامة الآتية $[M(L_1)_2Cl_2]$ ، $[M(L_1)_4Cl_2]$.

الجزء الثالث : تحضير الليكاندين (L_3, L_2) عن طريق مفاعلة الليكاند (L_1) مع معوضات كلوريد البنزويل بوجود ثلاثي اثيل امين بوصفه حافزاً قاعدياً لينتج الليكاندات الآتية:



في حين تضمن **الجزء الرابع** تحضير المعقدات التناسقية لليكاندين (L_3, L_2) وبنسب مولية

(١:١) و (١:٢) ليكاند إلى الأيون الفلزي والأملاح الفلزية المستعملة هي ($Ni(II), Co(II), Mn(II)$) و ($Zn(II), Cu(II)$) وامتلكت المعقدات الصيغة العامة الآتية $[M(L_n)Cl_2]$ ، $[M(L_3)_2]Cl_2$ و $[M(L_2)_2Cl_2]$ إذ ان ($L_n = L_2 \text{ or } L_3$)

تم تشخيص الليكاندات ومعقداتها التناسقية، بواسطة تحليل العناصر والتوصيلية الكهربائية والأطياف الإلكترونية والأشعة تحت الحمراء والقياسات المغناطيسية وطيف الرنين النووي المغناطيسي ($^1\text{H-NMR}$)

بينت قياسات التوصيلية الكهربائية بأن أغلب المعقدات المحضرة كانت غير موصلة ، في حين وجد أن المعقدات (26-30) تكون موصلة ونسبة مولية (2:1) (L:M) .

كما اكدت نتائج قياسات المغناطيسية والاطياف الالكترونية أن كل المعقدات التناسقية ذوات الصيغ العامة $[\text{M}(\text{L}_1)_2\text{Cl}_2]$ ، $[\text{M}(\text{L}_n)\text{Cl}_2]$ و $[\text{M}(\text{L}_3)_2\text{Cl}_2]$ إذ أن $(\text{L}_n=\text{L}_2 \text{ or } \text{L}_3)$ تمتلك أشكالاً رباعية السطوح ، اما المعقدات التناسقية ذوات الصيغ العامة $[\text{M}(\text{L}_1)_4\text{Cl}_2]$ و $[\text{M}(\text{L}_2)_2\text{Cl}_2]$ تمتلك أشكالاً ثمانية السطوح.

وتم استعمال النظرية الدالة الوظيفية للكثافة (Density Functional Theory) لاجراء الحسابات النظرية لليكاندات والمعقدات المحضرة وحساب بعض الدوال الفيزيائية ومنها الصلابة وجهد الكيمياء ودليل الالة الالكترونية وحساب طاقتي HOMO و LUMO للوصول الى معرفة استقرارية المعقدات المحضرة وسلوكها الألكتروفيلى.

كما درست الفعالية الحيوية لليكاندات ومعظم المعقدات المهيأة وبين هذا البحث أن لليكاندات وقسم من المعقدات لها قوة متوسطة وجيدة على تثبيط نمو ثلاثة انواع من الجراثيم وهي :

(*Bacillus Subtilis* , *Klebseiella pneumonia* , *Staphylococcus -aureus*)

Abstract

The research in this thesis includes the preparation and diagnosis of (30) coordination complexes, in addition to the preparation of three basic ligands. The research included four parts:

The first part: The preparation of the ligand (L₁) by reacting stoichiometric moles of piperonal, diketone (benzoyl) and para-phenylenediamine.

L₁=4-(2-(benzo-1,3-dioxol-5-yl)-4,5-diphenyl-2,5-dihydro-1H-imidazol-1-yl)aniline (C₂₈H₂₃N₃O₂)

The second part: The preparation of coordination complexes for the ligand above, in molar ratios of (1:2) (1:4) for the ligand to the metal ion, and the metal salts used are Mn(II), Ni(II), Co(II), Zn(II), Cu(II), and the complexes had the following general formula [M(L₁)₂Cl₂], [M(L₁)₄Cl₂].

The third part: The preparation of ligandins (L₃, L₂) by reacting the ligand (L₁) with benzoyl chloride substitutes in the presence of triethylamine as a basic catalyst to produce the following ligands:

L₂=N-(4-(2-(benzo-1,3-dioxol-5-yl)-4,5-diphenyl-2,5-dihydro-1H-imidazol-1-yl)phenyl)benzamide (C₃₅H₂₇N₃O₃)

L₃=N-(4-(2-(benzo-1,3-dioxol-5-yl)-4,5-diphenyl-2,5-dihydro-1H-imidazol-1-yl)phenyl)-3-nitrobenzamide (C₃₅H₂₆N₄O₅)

The **fourth part** included the preparation of the coordination complexes for ligands (L₃, L₂) with molar ratios of (1:1) and (1:2) ligand to the metal ion, and the metal salts used are Mn(II), Ni(II), Co(II), Zn. (II),Cu(II), and the complexes had the following general formula [M(L_n)Cl₂], [M(L_n)₂]Cl₂ where (L_n=L₂ or L₃)

The prepared ligands and their coordination complexes were characterized by elemental analysis, molar electrical conductivity, electronic and infrared spectra, magnetic measurements, and nuclear magnetic resonance (¹H-NMR)

spectroscopy Electrical conductivity measurements showed that most of the prepared complexes were non-conductive, while complexes (26-30) were found to be conductive with a molar ratio of (L:M)(2:1).

The results of magnetic measurements and electronic spectra also confirmed that all coordination complexes with the general formulas $[M(L_1)_2Cl_2]$, $[M(L_n)Cl_2]$ and $[M(L_3)_2]Cl_2$, where ($L_n=L_2$ or L_3) have quadrilateral shapes. surfaces, while coordination complexes with general formulas $[M(L_1)_4Cl_2]$ and $[M(L_2)_2]Cl_2$ have octahedral shapes.

Density Functional Theory was used to perform theoretical calculations for the prepared ligands and complexes, and calculate some physical functions, including hardness, chemistry potential, electronic affinity index, and calculate the HOMO and LUMO energies to reach knowledge of the stability of the prepared complexes and their electrophilic behavior.

The biological effectiveness of the ligands and most of the prepared complexes was also studied, and this study showed that the ligands and some of the complexes have moderate and good power to inhibit the growth of three types of bacteria, which are: (*Bacillus Subtilis* , *Klebseiella pneumonia* and *Staphylococcus -aureus*).

The Republic of Iraq
Ministry of Higher Education
and Scientific Research
Mosul University / College of Science
Department of Chemistry



**Synthesis and Characterization of New complexes of
transition and nontransition metals of heterocyclic
ligands derived from imidazole and evaluation
of their bacterial activity**

Roaa Raafat Abdul-jabbar

M.Sc. Thesis
Chemistry Science / Inorganic Chemistry

Supervised by
Assist. Prof. Dr. Farah Tariq Saeed

1445 A.H

2024 A.D